

Caracterización estructural simple de feldespatos alcalinos: metodología de trabajo

L. SANCHEZ MUÑOZ, J. GARCIA GUINEA

Museo Nacional de Ciencias Naturales, C.S.I.C., Madrid

S. LOPEZ ANDRES

Departamento de Mineralogía, Facultad de Ciencias Geológicas, U.C.M.

RESUMEN.—Caracterización estructural simple de feldespatos alcalinos: metodología de trabajo.

Los feldespatos alcalinos presentan variabilidad composicional (soluciones sólidas), texturas de exsolución, diversos grados de ordenamiento y diferentes estructuras (simetrías). Para definir la especie y sus características, se puede utilizar DRX e IR.

Se propone una metodología a seguir para la caracterización y clasificación de feldespatos alcalinos, a partir de los parámetros de celdilla, con los que se calculan variables de simetría, ordenamiento, composición y deformación interna.

Se presentan algunos ejemplos de indexación y sus correspondientes parámetros de celdilla, se procesan con el programa original CALPAR, escrito en MathCAD para el cálculo de las variables.

ABSTRACT.—Simple structural characterization of alkaline feldspars: methodology.

The XRD and IR Spectroscopy can be utilized for defining the characteristics and types of the complicated mineral group of alkaline feldspars. This kind of feldspars depicts: compositional variations (solid solutions), exsolution textures, ordering in several levels and different structures (symmetries). In order to characterize and classified the alkaline feldspars a methodology is proposed in this paper.

From the cell parameters, the variables of: symmetry, ordering, composition and internal deformation can be determined. Some examples of indexing and cell parameters are shown by using the CALPAR programme written in MathCAD.

1. INTRODUCCION

Los feldespatos constituyen el grupo mineralógico más abundante en la corteza terrestre, formando frecuentemente más del 50% de muchas rocas, presentándose en la mayoría de las rocas ígneas, y utilizándose generalmente para la clasificación de éstas. Sin embargo, en estas clasificaciones, tan sólo se tiene en cuenta su naturaleza química y no su naturaleza textural y estructural.

En el sector industrial de las materias primas naturales cerámicas existe cierta confusión entre materiales feldespáticos (granitos, sienitas nefelínicas, pegmatitas, ... y otras rocas poliminerálicas conteniendo feldespatos) y el grupo mineralógico de los feldespatos.

Su caracterización en la industria es extremadamente simple, solo punto de fusión y blancura, a lo sumo algo de composición química. Sin embargo, los feldespatos son quimicoestructuralmente muy complicados, tanto que se puede comprobar que un aparente monocristal tiene una estructura y composición en un borde y otras distintas en el otro (deformaciones, sustituciones, perturbaciones, alteraciones, etc.)

En este trabajo, se trata de la clasificación y la caracterización estructural (simetría, grado de ordenamiento Si/Al, grado de soluciones sólidas y deformación interna) de feldespatos alcalinos, esto es, silicoaluminatos de Na y K con estructura de tetraedros en armazón tridimensional, de simetría monoclinica y/o triclínica, utilizándose generalmente el concepto de estructura promedio (1, 2).

Los criterios que se utilizan para clasificar feldespatos alcalinos son: primero, composición química (K-Na); después, simetría (monoclinico-triclínico) y luego, distribución Si-Al (tabla I).

Considerando la gran abundancia de especies, es conveniente utilizar las siguientes abreviaturas:

E S P E C I E S		C. Q.
Na	K	
MA=Monalbita	HS=Sanidina Alta	Ab=Feldespato Na
AA=Analbita	LS=Sanidina Baja	An=Feldespato Ca
HA=Albita Alta	OR=Ortosa	Or=Feldespato K
LA=Albita Baja	LM=Microclina Baja	
	IM=Microclina Intermedia	
	(AD=Adularia)	

Además de los nombres anteriores, existen otros de uso común que indican otras propiedades. Así, el término adularia se refiere a un feldespato potásico con morfología característica que precipita a partir de soluciones hidrotermales. La amazonita es un feldespato potásico monoclinico o triclínico de color verde y/o azul. La cleavelandita es una albita baja en hábito laminar, que se desarrolla frecuentemente en drusas pegmatíticas, caracterizada por altos grados de pureza. El término analbita fue introducido para una albita triclínica con «historia monoclinica» (3, 1). Otros nombres se recogen de la bibliografía (4).

TABLA I
CLASIFICACION DE FELDESPATOS ALCALINOS
(Kroll, 1971; Ribbe, 1983-1984)

Composición química	Estructura	Nombre de la especie	Distribución Si-Al
K	C2/m	Sanidina alta (HS)	$0,5 < 2t_1 < 0,666$
		Sanidina baja (LS)	$0,666 < 2t_1 < 0,74$
		Ortosa (OR)	$0,74 < 2t_1 < 1,0$
	$\overline{C1}$	Microclina baja (LM)	$t_{10} = 1,0$ $t_{1m} = t_{20} = t_{2m} \approx 0,0$
		Microclina intermedia (IM)	$t_{10} > t_{2m} > t_{20} \approx t_{2m}$
Na	C1	Analbita (AA)	$t_{10} = t_{1m} = t_{20} = t_{2m} = 0,25$ (desordenada) o $t_{10} = t_{1m} > t_{20} = t_{2m}$ (parcialmente desordenada)
		Albita intermedia (IA)	$t_{10} > t_{1m} \approx t_{20} \approx t_{2m} \approx 0,0$
		Albita baja (LA)	$t_{10} \approx 1,0$ $t_{1m} \approx t_{20} \approx t_{2m} \approx 0,0$
	C2/m	Monalbita (MA)	$t_1 = t_2 = 0,25$ $2t_1 = 2t_2 = 0,5$

El estudio previo de cualquier muestra de feldespato, implica preparar una lámina delgada con sus correspondientes tinciones, lo que permite: a) una identificación rápida de la composición, y b) número de especies y de su disposición textural; datos necesarios a priori, para establecer el camino a seguir en la metodología.

El feldespato potásico se tiñe de amarillo, en lámina delgada, con cobaltinitrito sódico, previo ataque con HF. La plagioclasa se tiñe de rojo, o bien usando amarante, o bien con rhodizonato potásico (previamente se ataca con HF y después se baña el $BaCl_2$ (5).

2. PREPARACION DE LAS MUESTRAS

Una vez efectuado el muestreo, se siguen los siguientes pasos: separación, molienda y tamizado (fig. 1).

La separación de los feldespatos de otros minerales en muestras de grano grueso se puede realizar a mano (por ejemplo, en pegmatitas) y con control bajo lupa binocular. En muestras de grano fino y medio (por ejemplo, en granitos), primero se separan los ferromagnesianos por métodos magnéticos, después se separa el cuarzo (6, 7), para dar lugar a una mezcla final de feldespatos realmente difícil de separar. Para ello se suelen usar líquidos densos (tetrabromoetano, bromoformo, decalina, etc.) (5).

El tamaño ideal de partículas en DRX e IR, esta comprendido entre 1-10 μm , aunque en muestras giratorias se pueden utilizar con 50 μm en DRX, por lo que la molienda debe ir encaminada a conseguir los menores tamaños de grano posibles, sin formas preferentes. Los molinos de bolas y de mortero (ágata) son los más indicados. El polvo final debe pasarse por un tamiz de 0,063 mm, pero no por el de 0,040

mm, tomando así un tamaño más o menos homogéneo, que permitirá medidas comparables.

Cuando existe mezcla de feldespatos debe tenerse en cuenta el tiempo de molienda y la cantidad de muestra molida, debido a procesos de intercambio iónico (Na-K) por la presión del mortero (4), produciéndose variaciones en el ángulo 2θ de hasta $0,05^\circ$. Por ello, se aconseja moler siempre las mismas cantidades y el mismo tiempo, con objeto de producir el mínimo error sistemático. En feldespatos pertíticos en los que existe albita en proporciones que varían entre 5-25%, se pueden producir variaciones del orden de $0,1^\circ$ en 2θ .

Para la preparación de muestras en IR, se mezcla un grano de bromuro potásico calidad infrarrojo, y 1,5 mg de muestras, preparando pastillas con una presión de 8 ton. durante cinco minutos (8).

3. RECONOCIMIENTO PRELIMINAR

Partiendo de los datos de lámina delgada (composición y textura), mediante DRX e IR, se puede conocer de forma rápida el número de feldespatos (pertitas, criptopertitas) y su estructura (simetría).

En DRX interesa obtener un difractograma rápido inicial entre 20 y 32° (2θ), cuyo fin es observar las reflexiones (-201) para la composición y (131)-(1-31) para la simetría. En Or (-201) estará comprendido entre $20,9$ y $21,5^\circ$ (2θ), y en Ab entre $21,5$ y $22,2^\circ$ (2θ). Generalmente, aparecen las dos reflexiones, siendo la de mayor intensidad la fase predominante (pertitas-antipertitas). Para conocer las proporciones entre ambos feldespatos, se usan curvas de calibrado considerando las relaciones entre los picos (-201) y (002).

Otro problema es el de la existencia de cuarzo como im-

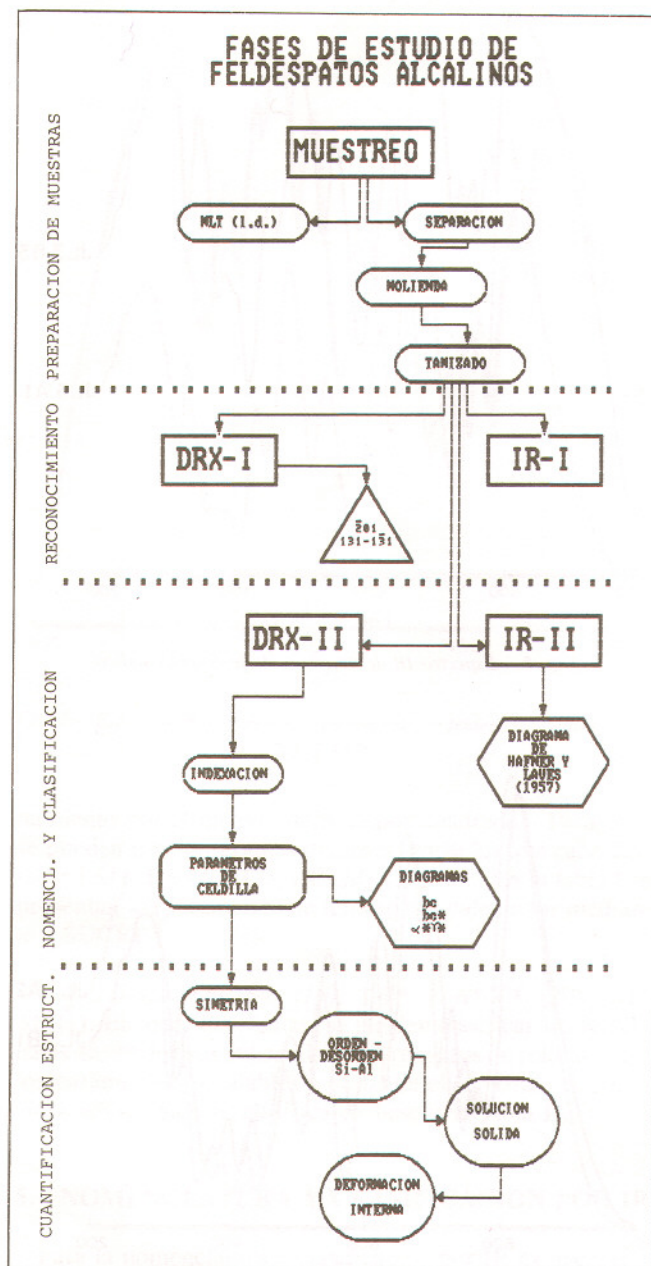


Fig. 1.—Fases de estudio de los feldespatos alcalinos.

pureza, en cuyo caso se producirá un solapamiento de Or (-201) con Q (100). En tal supuesto, se debe buscar Or (002), que aparece a $27,5^\circ$ (2θ) aproximadamente para confirmar su existencia, que no debe confundirse con Ab-An (002) a $27,7-28,1^\circ$ (2θ).

Partiendo de Or inicialmente, para conocer su simetría se estudia el desdoblamiento de Or (131), que aparecen entre 29 y $30,5^\circ$ (2θ). Si Or es monoclinico, Or (131) aparecerá a $29,7-29,8^\circ$ (2θ) como una sola reflexión más o menos clara. Sin embargo, cuando Or es triclínico, se produce un desdoblamiento, apareciendo Or (131) entre $29,4$ y 30° (2θ), y Or (1-31) aproximadamente a $30,2^\circ$ (2θ) (9, 10). En la figura 2 se pueden observar ejemplos de ambos casos.

Si el feldespato es Ab, será triclínico, si es natural (ya que no se han encontrado monoclinicos naturales), y Ab (131) estará desdoblado en Ab (131) entre $30,3$ y $31,2^\circ$ (2θ), y Ab (1-31) (31) aproximadamente a $30,1^\circ$ (2θ) (fig. 3).

MARZO-ABRIL, 1991

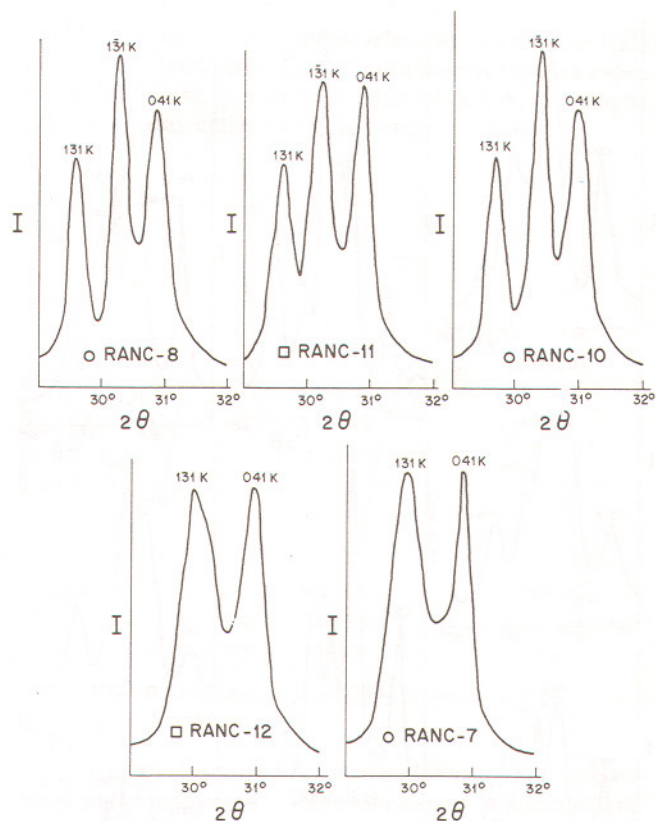


Fig. 2.—Estudio de la simetría de feldespatos potásicos: las muestras RANC-8, 11 y 10 presentan desdoblamiento de los picos 131 y 1-31, por lo que son triclínicas, mientras que RANC-12 y 7, no lo presentan, y por lo tanto son monoclinicas.

Cuando se trata de un feldespato pertítico o una mezcla de feldespatos de diferente composición sin separar, se produce un solapamiento de líneas en esta región, junto con Ab (0-41) a $30,5^\circ$ (2θ), en cuyo caso es necesario recurrir a otras líneas de difracción y a indexaciones completas pero ya en difractogramas de alta precisión (fig. 4).

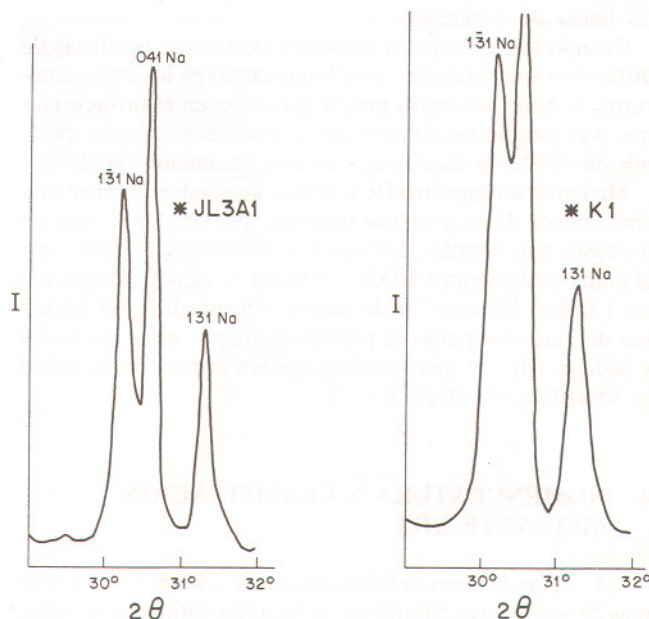


Fig. 3.—Dos ejemplos de feldespatos sódicos triclínicos con desdoblamiento de las reflexiones 131 y 1-31.

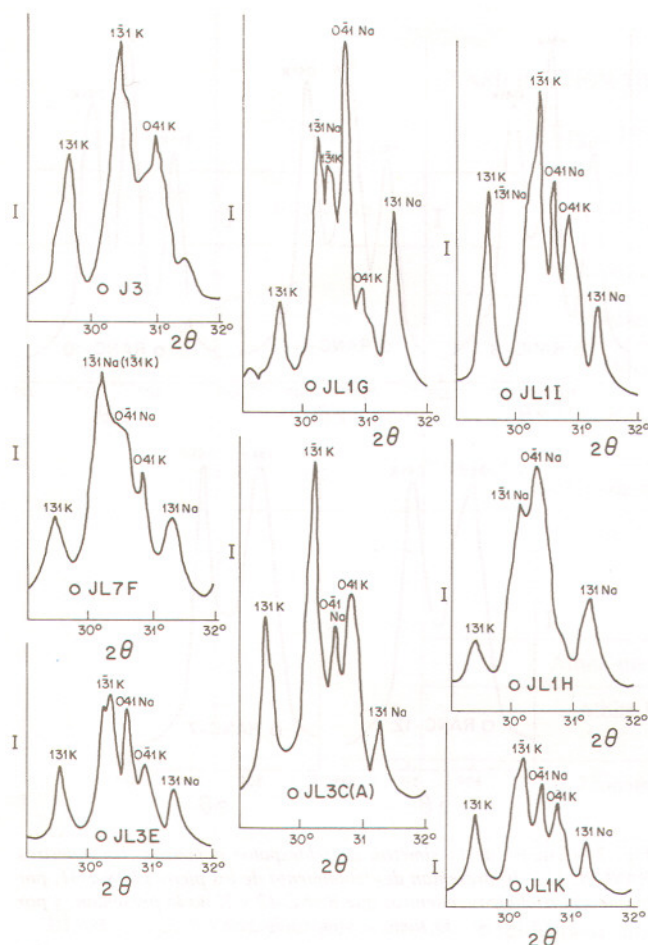


Fig. 4.—Diversos ejemplos de mezclas de feldspatos, con solapamientos entre las líneas de difracción más importantes.

Otro problema común es la existencia de varias simetrías en la misma muestra, ya sea porque existan varias especies o por estructuras complejas con diferentes dominios estructurales, dando lugar a ensanchamiento y solapamientos de las líneas de difracción.

Cuando los feldspatos son criptopertíticos, las líneas de difracción son anómalas, por lo que como en los casos anteriores se hace necesario mayor precisión en el difractograma, o el estudio mediante microscopía electrónica de transmisión (TEM) o electrónica de alta resolución (HREM).

Mediante un espectro IR sencillo, se pueden obtener muchos menos datos y menos precisos que por DRX, aún en los casos más simples. La banda de absorción a estudiar está comprendida entre 4.000 y 400 cm^{-1} , siendo la zona entre 1.000 y 200 cm^{-1} la de mayor información. En los casos de muestras puras es posible distinguir entre potásicos y sódicos (fig. 5), pero cuando existen impurezas es difícil su identificación (figs. 6 y 7)

4. NOMENCLATURA Y CLASIFICACION MEDIANTE DRX

4.1. *Condiciones del difractograma.*—Dados los problemas de estructuras complejas, soluciones sólidas, maclados, etc., la precisión es muy importante, y es necesario, por tanto, usar el mayor número posible de medios.

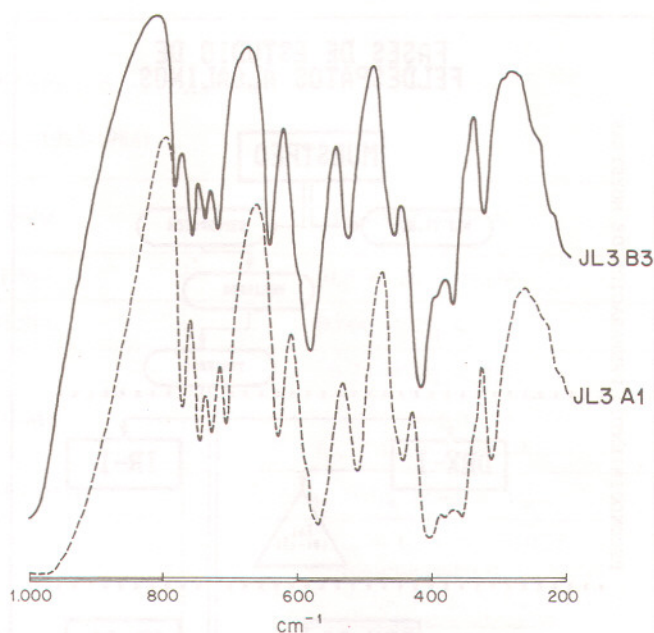


Fig. 5.—Espectro IR de muestras de feldespato sódico.

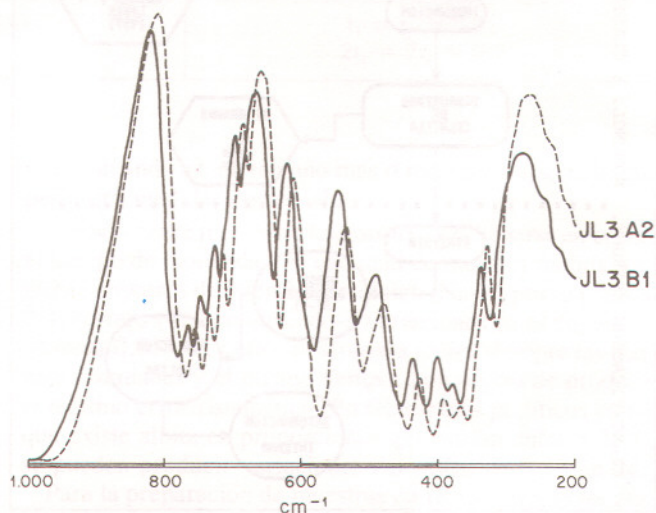


Fig. 6.—Espectro IR de muestras de feldespato sódico con impurezas de cuarzo.

Para empezar, se debe calibrar el aparato con patrones externos de fluorita y/o silicio metal para 2θ entre 28 y 55°, y KBrO_3 para 2θ entre 20 y 28°. También se puede usar fluorita como patrón interno, calentándola previamente a unos 800°C durante 48 h. (11).

Los difractogramas se deben registrar a 40-50 kV, 30-40 mA, entre 20 y 55° (2θ), 0,2-0,3°/min, constante tiempo 4 ó 5 s., 20-40 mm/ 2θ , con monocromador de grafito, rejilla automática y rotación de la muestra.

4.2. *Indexación.*—Para comparar, se pueden usar los datos bibliográficos (12, 13, 14, 1, 15). Así, en la tabla I se muestran algunas indexaciones para feldspatos alcalinos de los tipos LM, HS, AD y LA.

4.3. *Cálculo de parámetros de celdilla.*—Mediante refi-

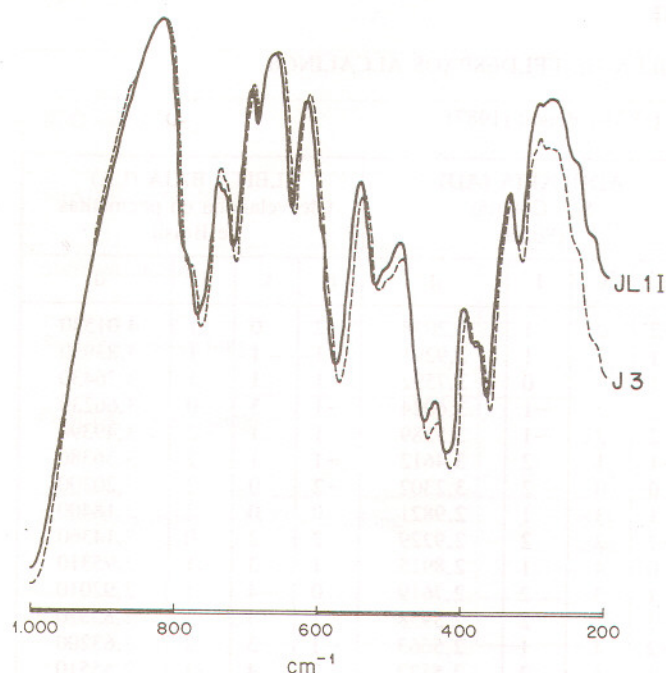


Fig. 7.—Espectro IR de muestras con mezclas de feldespato potásico, sódico y cuarzo.

namiento por el método de mínimos cuadrados. Para ello, se pueden usar programas diversos, entre los que cabe destacar LSUCRE (16, 17), LCLSQ (18), etc. En la tabla I se presentan los parámetros de feldespatos calculados mediante LSUCRE.

4.4. Diagramas b-c (19). b-c* y $\alpha^*\text{-}\Gamma^*$ (20), $\Sigma t_1\text{-}\Delta t_1$ (1). En estos diagramas, se pueden clasificar los feldespatos alcalinos bien utilizando los parámetros de celdilla, bien los parámetros calculables a partir de ellos. Una vez conocidos estos datos se clasifica en base a la tabla II.

5. NOMENCLATURA Y CLASIFICACION POR IR

Para la nomenclatura y clasificación por IR es necesario usar métodos precisos de preparación de muestras (8).

La asignación de bandas en feldespatos alcalinos fue realizada primero cualitativamente (21) y después detalladamen-

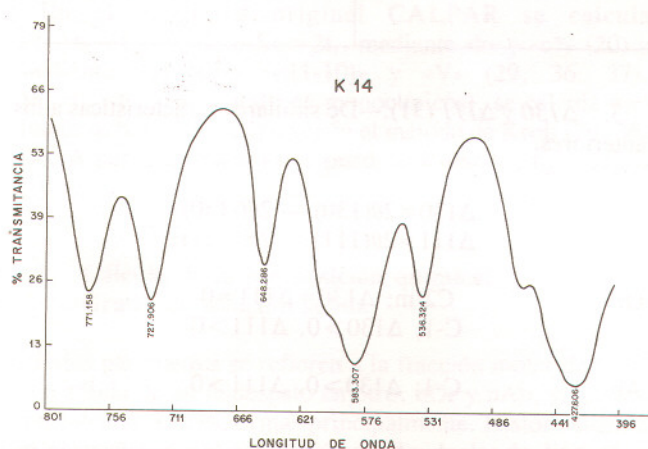


Fig. 8.—Espectro IR de precisión de microclina baja (LM).

te (22, 23), las frecuencias establecidas están entre 1.200 y 400 cm^{-1} (tabla III). En la figura 8 se recoge un espectro de IR en LM, y otro en la figura 9 de LA, con asignación de bandas entre 800 y 400 cm^{-1} .

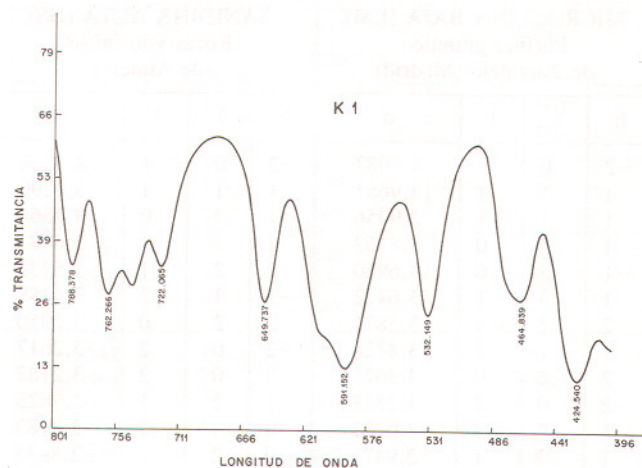


Fig. 9.—Espectro IR de precisión de albita baja (LA).

Las bandas de absorción más resolutivas, en lo que respecta a la composición y ordenamiento, se encuentran entre 15,35 y 15,85 μm (651-631 cm^{-1}) y 18,1 y 18,9 μm (552-529) (24, 8). Por esto, se pueden dibujar los contornos aproximados de las diferentes especies feldespáticas (25), utilizando el diagrama de Hafner y Laves (1957) (24) (fig. 10).

6. CUANTIFICACION ESTRUCTURAL DE FELDESPATOS ALCALINOS POR DRX

6.1. Cálculo de la simetría

1. Triclinicidad Δ (9, 10).—En feldespatos alcalinos, se calcula por la fórmula $\Delta = 12,5 (d_{131} - d_{1-31})$ donde d_{131} y d_{1-31} son los espaciados de dichos planos. Para los feldes-

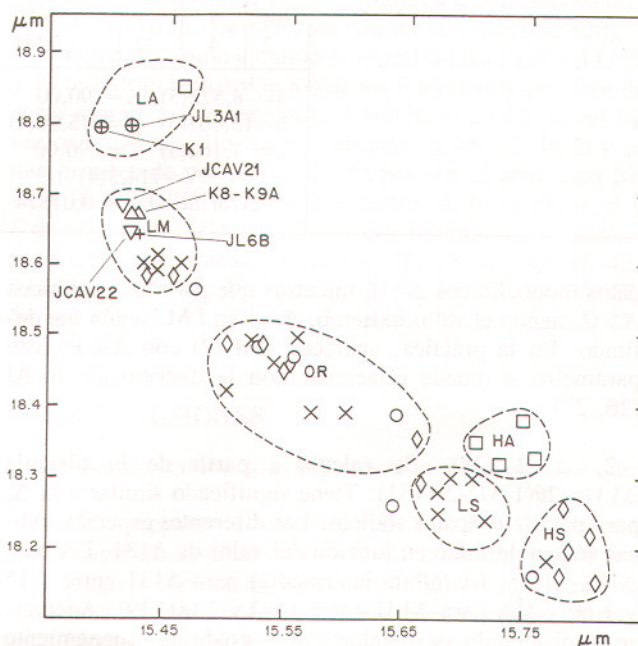


Fig. 10.—Diagrama de Hafner y Laves (1957).

TABLA II

INDEXACION Y PARAMETROS DE CELDILLA DE FELDESPAOS ALCALINOS

(Lsuore, Appleman y Evans (1873), Benoit (1987))

MICROCLINA BAJA (LM) Pórfido granítico de Zarzalejo (Madrid)				SANIDINA ALTA (HS) Rocas volcánicas de Almería				ADULARIA (AD) San Gotardo (Suiza)				ALBITA BAJA (LA) Cleavelandita en pegmatitas de Brasil			
h	k	l	d	h	k	l	d	h	k	l	d	h	k	l	d
-2	0	1	4,2083	-2	0	1	4,1854	-2	0	1	4,2038	-2	0	1	4,01530
1	1	1	3,9681	1	1	1	3,9199	1	1	1	3,9291	1	-1	1	3,83950
1	-1	1	3,9456	1	3	0	3,7664	1	3	0	3,7592	1	1	1	3,76430
1	3	0	3,8162	1	3	1	3,6083	1	3	-1	3,6024	-1	3	0	3,66230
-1	3	0	3,6960	2	2	-1	3,5232	2	2	-1	3,5289	1	1	-2	3,49390
1	3	-1	3,6472	-1	1	2	3,4488	-1	1	2	3,4612	-1	1	2	3,36380
2	2	-1	3,5871	2	2	0	3,2950	0	0	2	3,2302	-2	0	2	3,20200
1	1	-2	3,4728	-2	0	2	3,2617	1	3	1	2,9821	0	0	2	3,18400
2	2	0	3,3621	0	0	2	3,2182	-2	2	2	2,9229	2	2	0	3,14360
-2	0	2	3,2828	1	3	1	2,9825	0	4	1	2,8915	1	-3	1	2,95310
1	3	1	3,0231	0	4	1	2,8983	-1	3	2	2,7619	0	-4	1	2,92010
1	-3	1	2,9471	0	2	2	2,8833	-3	1	2	2,5958	1	3	1	2,85370
-1	3	2	2,7512	-1	3	2	2,7599	-2	4	1	2,5663	-1	3	2	2,63200
2	4	-1	2,6133	-3	1	2	2,5862	1	1	2	2,5532	2	4	-1	2,55510
-2	4	1	2,5196	-2	4	1	2,5694	3	1	0	2,5124	-2	4	1	2,43780
3	3	-1	2,4233	1	1	2	2,5405	2	4	0	2,4765	1	5	0	2,40170
0	6	0	2,1556	3	1	0	2,5010	-1	5	1	2,4096	-3	1	0	2,38150
2	0	2	2,0728	2	4	0	2,4776	-3	3	1	2,3761	3	3	-1	2,31370
4	2	-2	2,0306	-1	5	1	2,4169	-1	1	3	2,3234	1	-5	1	2,18380
2	-2	2	1,9600	-3	3	1	2,3737	0	6	0	2,1589	0	6	0	2,12090
4	0	0	1,9245	-1	1	3	2,3146	2	4	1	2,1213	2	-4	1	2,07370
-2	0	4	1,8035	1	5	1	2,1994	-4	2	2	2,0034	2	4	1	2,03100
a = 8,559(5) α = 90,63(6) b = 12,938(5) β = 115,89(4) c = 7,199(5) Γ = 87,77(5) V = 716,7(5) Error Standard = 0,01201				0	6	0	2,1687	2	2	2	1,9689	0	6	1	1,97810
				2	4	1	2,1218	4	0	0	1,9206	2	-2	2	1,92480
				0	6	1	2,0554	1	1	3	1,8546	2	2	2	1,88700
				-4	2	2	1,9980	-2	0	4	1,8000	-4	0	3	1,84870
				2	2	2	1,9655	a = 8,545(3) α = 90,00 b = 12,947(4) β = 115,97(3) c = 7,195(2) Γ = 90,00 V = 715,7(3) Error Standard = 0,01268				0	-6	2	1,82580
				-3	3	3	1,9492					4	0	0	1,82120
				4	0	0	1,9174					1	1	3	1,80090
				-4	0	3	1,9025					-2	0	4	1,78310
				1	1	3	1,8489					4	4	-2	1,73970
				0	6	2	1,8009					a = 8,138(5) α = 94,20(7) b = 12,756(7) β = 116,57(4) c = 7,134(4) Γ = 87,77(6) V = 661,4(5) Error Standard = 0,02514			
				-2	0	4	1,7927								
				-4	4	1	1,7689								
				2	4	2	1,7441								
				a = 8,522(3) α = 90,00 b = 13,007(5) β = 115,96(4) c = 7,166(3) Γ = 90,00 V = 714,3(4) Error Standard = 0,01874											

patos monoclinicos $\Delta=0$, mientras que para los triclínicos $\Delta>0$, siendo el valor extremo, $\Delta=1$ en LM, según fue definido. En la práctica, aparecen LM (2) con $\Delta<1$. Este parámetro se puede relacionar con la distribución Si/Al (26, 27).

2. Δ_{131} (28).—Se calcula a partir de la fórmula $\Delta_{131}=2\theta(1-31)-2\theta(131)$. Tiene significado similar a la Δ , pero para feldespatos sódicos. Las diferentes especies sódicas se han definido en función del valor de Δ_{131} , LA para $\Delta_{131}<1,15$, IA (albita intermedia) para Δ_{131} entre 1,15 y 1,60 y HA para Δ_{131} entre 1,60 y 2,00 (29). Además, se ha observado su relación con el grado de ordenamiento y la temperatura de formación del mineral (30).

3. Δ_{130} y Δ_{111} (31).—De similares características a los anteriores.

$$\Delta_{130}=2\theta(130)-2\theta(-130)$$

$$\Delta_{111}=2\theta(111)-2\theta(-111)$$

Or: $C2/m$; $\Delta_{130}=\Delta_{111}=0$
C-1; $\Delta_{130}>0$, $\Delta_{111}>0$

Ab: $C-1$; $\Delta_{130}>0$, $\Delta_{111}>0$

Todos estos parámetros referentes a la simetría están relacionados con el grado de ordenamiento (1).

TABLA III

	Microclina	Sanidina	Albita baja	Albita alta
Si-O «stretching»	1.142 1.134	1.128 —	1.136 1.096	—
Si(Al)-O «stretching»	1.044 1.010	1.020 —	1.032 990	1.017 —
Si-Si «stretching»	768 —	770 —	784 758	792 763
Si-Al (Si) «stretching»	742 728	720 —	740 720	726 —
O-Si (Al)-O «bending»	648 602 584	633 580 —	648 604 588	642 587 —
O-Si-O «bending» y M-O «stretching»	535 463 —	542 464 —	528 476 463	542 460 —
Si-O-Si «deformation»	428	428	425	428

6.2. Cálculo de la distribución Si/Al: Grado de ordenamiento

En la bibliografía existe gran número de símbolos que complican la comprensión de su significado. En este trabajo se sigue la simbología y nomenclatura de Kroll y Ribbe (1987) (20).

Estos parámetros se refieren al contenido en Al y Si de las diferentes posiciones tetraédricas (en monoclinos T_1 y T_2 , en triclinos T_{10} , t_{1m} , T_{20} y T_{2m}) (32). El contenido en Al en cada posición (t_1 , t_2 , t_{10} , t_{1m} , t_{20} y t_{2m}) varía de 0 a 1, sabiendo que $2t_1 + 2t_2 = 1$, y $t_{10} + t_{1m} + t_{20} + t_{2m} = 1$, para Si/Al=3/1 siendo la estructura triclinica de máximo orden aquella en la que todo el Al se encuentra en posición T_{10} , esto es, $t_{10}=1$, y la de desorden total cuando el Al se encuentra repartido por igual en las cuatro posiciones, esto es, $t_{10}=t_{1m}=t_{20}=t_{2m}=0,25$. Para estructuras monoclinas el orden máximo para $2t_1=2t_2=0,5$ (33, 19, 2).

Este tipo de parámetros se pueden calcular o bien a través de las dimensiones de celdilla (b y c , b y c^* , b^* y c^* , α y Γ , α^* y Γ^*) (33, 19, 5, 34, 35, 20) o bien a través de traslaciones reticulares ($tr[110]$ y $tr[1-10]$) (29, 36, 37, 20).

En el programa original CALPAR se calcula $\Sigma t_i = t_{10} + t_{1m}$, (C-1) o $\Sigma t_i = 2t_1$, mediante «b» y «c*» (20) y mediante «tr[110]», «tr[1-10]» y «V» (29, 36, 37). $\Delta t_i = t_{10} - t_{1m}$ (sin sentido en monoclinos), se calcula mediante « α^* » y « Γ^* » (20) o según el método de Kroll (29, 36, 37). A partir de éstos ya se puede calcular t_{10} , t_{1m} y $2t_2$, o t_1 y t_2 .

6.3. Cálculo de la composición química: Grado de solución sólida

Estos parámetros se refieren a la fracción molar de solución sólida de un feldespato en otro, nOr y nAb , y se pueden calcular de tres formas principalmente. Históricamente se ha calculado a partir de líneas individuales de difracción (-201). Más tarde se calcularon principalmente a partir del

parámetro de celdilla «a», pero está sujeto a error en feldespatos deformados o anómalos, esto es criptopertitas, finalmente se ha desarrollado el método de cálculo a través del volumen de celdilla «V» (19, 38, 15).

6.4. Cálculo de la deformación interna

Los feldespatos anómalos son aquellos que presentan deformación estructural observable por las relaciones entre los parámetros de celdilla y calculable mediante el parámetro \hat{a} definido como la diferencia entre la dimensión de celdilla «a» observada y la estimada a través del diagrama binario b-c (19).

El parámetro S.I. («strain index»), con el mismo significado (calculado también en el programa CALPAR) es otra medida del grado de deformación de la estructura (20).

Finalmente, como ejemplo se muestran las figuras 11, 12 y 13 muestran la distribución de los feldespatos alcalinos de rocas graníticas, de pegmatitas y sintéticos en diagramas binarios b-c. Para ello, se han tomado en ASCII (PE2) y se han proyectado por diferentes grupos con el programa BITER (GWBASIC) (39) los parámetros a , b , c , c^* , α , β y Γ de más de 800 feldespatos alcalinos bibliográficos, correspondientes a 43 trabajos diferentes (8, 15, 20, 40, 41, 42, 43, 44, 45, 46, 47, 48, 49, 50, 51, 52, 53, 54, 55, 56, 57, 58, 59, 60, 61, 62, 63, 64, 65, 66, 67, 68, 69, 70, 71, 72, 73, 74, 75, 76, 77, 78, 79).

7. CONCLUSIONES

De acuerdo con los datos expuestos, se puede concluir que:

- Para preparar las muestras hay que observarlas previamente al microscopio de polarización (teñidas) y después separar las partículas a estudiar en la lupa binocular. Para molerlas hay que tener en cuenta los problemas de intercambio catiónico Na-K por la presión del mortero.

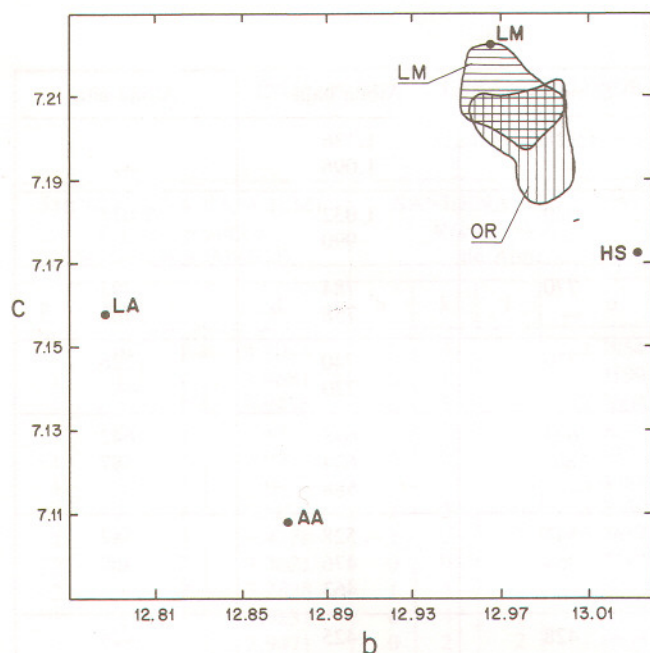


Fig. 11.—Diagrama b-c en el que se representan feldespatos potásicos de rocas graníticas.

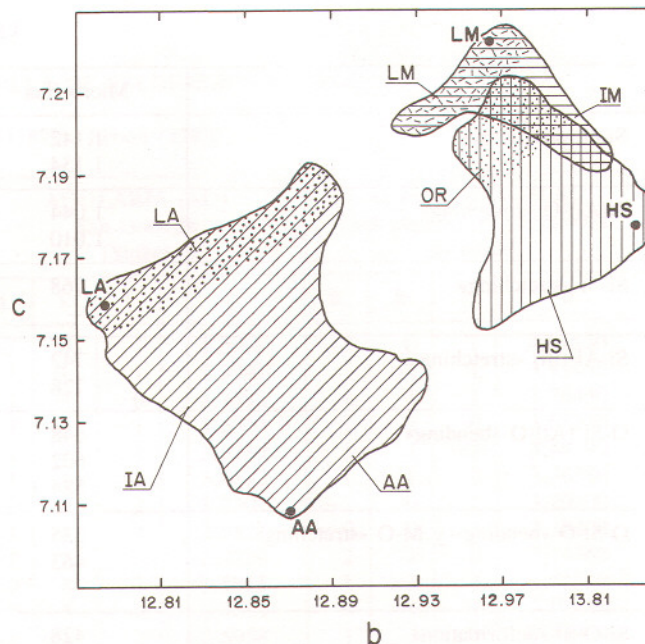


Fig. 13.—Diagrama b-c en el que se representan feldespatos potásicos y sódicos sintetizados por diversos métodos.

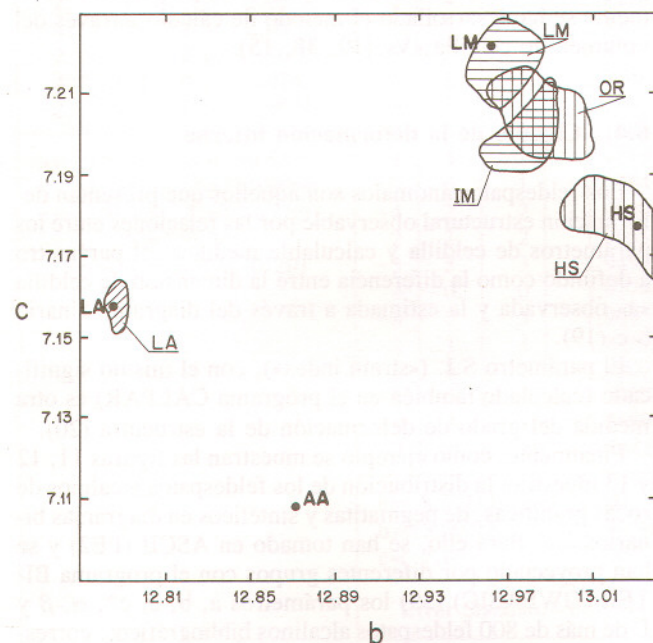


Fig. 12.—Diagrama b-c en el que se representan feldespatos potásicos (LM, IM, OR, HS) y sódicos (LA) en pegmatitas graníticas.

— Debido a la complejidad estructural de los feldespatos alcalinos, hay que medir por DRX con mucha precisión. Los mejores métodos de indexación son los expuestos en el apéndice del libro «Feldspar Mineralogy» (1, 15).

— Los diagramas más interesantes para clasificar los feldespatos alcalinos son b-c, b-c*, $\alpha^*\text{-}\Gamma^*$ y $\Sigma\text{t}_1\text{-}\Delta\text{t}_1$ (20).

— Utilizando IR, las bandas más resolutivas para com-

posición y ordenamiento están entre 15,35 y 15,85 μm ($651\text{-}631\text{ cm}^{-1}$) y 18,1 y 18,9 μm ($552\text{-}529$) (21).

— Se ha comprobado la efectividad de la DRX para el cálculo de la simetría, distribución Si/Al, grado de ordenamiento, composición química (solución sólida) y deformación interna de los feldespatos alcalinos. Obviamente, es preferible hacer medidas más precisas sobre monocristal con cámara Guinier de alta focalización pero es una técnica mucho más lenta.

8. APENDICE

Los usuarios del procesador matemático MathCad interesados en el programa CALPAR para el cálculo de parámetros de feldespatos alcalinos pueden ponerse en contacto con los autores en el Museo Nacional de Ciencias Naturales (c/ José Gutiérrez Abascal, 2 - 28006 Madrid). (Cabe en un disco de ordenador sencillo 2S/2D de 5 1/4).

9. BIBLIOGRAFIA

1. RIBBE, P.: Chemistry, structure and nomenclature of Feldspars. En *Feldspar Mineralogy*, 2nd edition (P. H. Ribbe, ed.). *Mineral. Soc. Amer. Rev.*, 2 (1983), 1-19.
2. RIBBE, P.: Average structures of alkali and plagioclase feldspars: systematics and applications. En *Feldspars and Feldspathoids*. (Ed. William L. Brown). *NATO ASI Sc.*, 137 (1984), 1-49.
3. LAVES, F.: The feldspar, their polysynthetic twinning and their phase relations. *Rend. Soc. Mineral. Ital.*, 16 (1960), 37-100.
4. BARTH, T. F. W.: *Feldspars*. Wiley Intersci. John Wiley (1969), 261 pp.
5. SMITH, J. V.: *Feldspar minerals I. Crystal structure and*

- physical properties. Springer Verlag Heidelberg (1974a), 627 pp. Feldspar minerals II. Chemical and textural properties. Springer Verlag Heidelberg (1974b), 690 pp.
6. HERBER, L. J.: Separation of feldspar from quartz by flotation. *Am. Mineral.*, 54 (1969), 1.212-1.215.
7. BUCKERMAN, M. H. y ROGERS, J.: Flotation of quartz and feldspar by dodecylamine. *Trans. Inst. Mining Met.*, 64 (1954), 11-30.
8. MARTIN, R. F.: Cell parameters and infrared absorption of synthetic high to low albites. *Contrib. Mineral. Petrol.*, 26 (1970), 62-74.
9. GOLDSMITH, J. R. y LAVES, F.: The microcline-sanidine stability relations. *Geochem. Cosmochim. Acta* 5 (1954a), 1-19.
10. GOLDSMITH, J. R. y LAVES, F.: Potassium feldspar structurally intermediate between microcline and sanidine. *Geochem. Cosmochim. Acta*, 6 (1954b), 100-118.
11. BLASI, A., BRAJKOVIC, A., DE POL BLASI, C., FOORD, E. E. y MARTIN, R. F.: Structure refinement and genetic aspects of a microcline overgrowth on amazonite from Pikes Peak batholith, Colorado, USA. *Bull. Mineral.*, 107 (1984), 411-422.
12. WRIGHT, T. L.: X-ray and optical study of alkali feldspar: II an X-ray method for determining the composition and structural state from measurement state from measurement of 2θ values for three reflections. *Am. Miner.*, 53 (1968), 88-104.
13. BORG, I. y SMITH, D. K.: Calculated powder patterns. Part II. Six potassium feldspar and barium feldspar. *Am. Mineral.*, 54 (1969), 163-181.
14. BLASI, A.: The variation of the 2θ angles in powder diffraction patterns of one- and two-step K-rich feldspar. *Bull. Mineral.*, 107 (1984), 437-445.
15. KROLL, H., SCHMIEMANN, I. y VON COLLN, G.: Feldspar solid solutions. *Am. Mineral*, 71 (1986), 1-16.
16. APPLEMAN, D. E. y EVANS, J.: H. T. Job 9214 U.S. Geol. Surv. Computer Contrib., 20 (1983), 67 pp. (NTIS, Doc. PB 2-16188).
17. BENOIT, P. H.: Adaptation to microcomputer of the Appelmann-Evans program for indexing and least-squares refinement of powder-diffraction data for unit-cell dimensions. *Am. Mineral*, 72 (1987), 1.018-1.019.
18. BURNHAM, C. W.: Lattice constant refinement Carnegie Inst. Washington. *Year Book*, 61 (1962), 132-135.
19. STEWART, D. B. y WRIGHT, T. L.: Al/Si order and symmetry of natural alkali feldspar, and the relationship of strained cell parameters to bulk composition. *Bull. Soc. Franc. Miner. Cristall.*, 97 (1974), 356-377.
20. KROLL, H. y RIBBE, P. H.: Determining (Al, Si) distribution and strain in alkali feldspar using lattice parameters and diffraction-peak positions: A review. *Am. Mineral.*, 72 (1987), 491-506.
21. LAVES, F. y HAFNER, S.: Infrared absorption effects nuclear magnetic resonance and structure of feldspar. *Norsk Geol. Tidsskr.*, 42 (1962), 57-71.
22. ILLSHI, K., TOMISAKA, T., KATO, T. y UMEGAKI, Y.: The force field of k-feldspar. *Z. Krist.*, 134 (1971a), 213-229.
23. ILLSHI, K., TOMISAKA, T., KATO, T. y UMEGAKI, Y.: Isomorphous substitution and infrared and far infrared spectra of the feldspar group. *Neues Jahrb. Mineral. Abh.*, 115 (1971b), 98-119.
24. HAFNER, S. y LAVES, F.: Ordnung/Unordnung und Ultrarotabsorption II. Variation de Lage und Intensität einiger Absorptionen von Feldespaten. Zur Struktur von Orthoclas und Adular. *Z. Krist.*, 109 (1957), 204-225.
25. CERNY, P. y CHAPMAN, R.: Adularia from hydrothermal vein deposits: extremes in structural state. *Canadian Mineralogist.*, 24 (1986), 717-728.
26. FERGUSON, B. F.: Form unit-cell parameters to Si/Al distribution in K-feldspar. *Can. Mineral.*, 18 (1980), 443-458.
27. FERGUSON, B. F.: Form unit-cell parameters to Si/Al distribution in K-feldspar: Corrigendum. *Can. Mineral.*, 19 (1981), 363-365.
28. MACZENZIE, W. S.: The crystalline modification of $\text{NaAlSi}_3\text{O}_8$. *Am. J. of Sci.*, 255 (1957), 481-516.
29. KROLL, H.: Determination of Al, Si distribution in alkali feldspar from X-ray powder data. *Neues Jahrb. Mineral. Monatsh.*, 2 (1971), 91-94.
30. BROWN, W. L. y PARSONS, I.: Alkali feldspar: ordering rates, phase transformations and behaviour diagrams for igneous rocks. *Mineral. Mag.*, 53 (1989), 25-42.
31. MARFUNIN, A. S.: «The feldspars: phase relations, optical properties and geological distribution (Trans. from the Russian edition, 1962). Israel Prog. Sci. Translations. Jerusalem (1966), 317 pp.
32. MEGAW, H. D.: Notation for feldspar structures. *Acta Crystallog.*, 9 (1956), 56-60.
33. STEWART, D. B. y RIBBE, P. H.: «Structural for variations in cell parameters of alkali feldspar with Al/Si ordering». *Am. J. Sci.*, 267-A (1969), 144-462.
34. BLASI, A.: Different behavior of D(bc) and D(b*c*) in alkali feldspar. *N. Jh. Mineral. Abh.*, 138 (1980) 109-121.
35. KROLL, H. y RIBBE, P. H.: Lattice parameters and determinative methods for plagioclase and ternary feldspar. En *Feldspar Mineralogy*, 2nd edition (P. H. Ribbe, ed.). *Mineral. Soc. Amer. Rev. Mineral.*, 2 (1983), 57-99.
36. KROLL, H.: Estimation of the Al, Si distribution of feldspar from the lattice translation $\text{tr}[110]$ in Alkali feldspars. *Contrib. Mineral. Petrol.*, 39 (1973), 141-156.
37. KROLL, H.: Estimation of the Al, Si distribution of alkali feldspar from lattice translations $\text{tr}[110]$ and $\text{tr}[110]$. Revised diagrams. *N. Jb. Miner. Mh.*, H1 (1980), 31-36.
38. HOVIS, G. L.: Behavior of alkali feldspar: crystallographic properties and characterization of composition and Si-Al distribution. *Am. Mineral.*, 71 (1986), 869-890.
39. BENITO GARCÍA, R. y MARTÍNEZ FRÍAS, J.: Bitercia: GW-Basic program to plot classification diagrams. *Computers & Geosciences.*, 16-2 (1990), 265-271.
40. HEWLETT, C. G.: Optical properties of potassic feldspar. *Geol. Soc. Am. Bull.*, 70 (1959), 511-538.
41. WRIGHT, T. L.: The microcline-orthoclase transforma-

- tion in the contact aureole of the Eldora stock, Colorado. *Amer. Mineral.*, 52 (1967), 117-136.
42. KEEFER, K. D. y BROWN, G. E.: Crystal structures and compositions of sanidine and high albite in cryptoperthitic intergrowth. *Am. Mineral.*, 63 (1978), 1.264-123.
 43. ALBERTI, A. y STOLFA, D.: II Feldspato potassico di una pegmatite del Passo della Rossola (Adamello sud-occidentale). *Period. mineral.*, 36 (1967), 797-810.
 44. STEVENSON, R. K. y MARTIN, R. F.: Implications of the presence of amazonite in the Broken Hill and Geco metamorphosed sulfide deposits. *Canadian Miner.*, 24 (1986), 729-745.
 45. ONDARROA, C., GIL, P. P. y PESQUERA, A.: Parámetros de celda y distribución Al, Si en feldspatos alcalinos de pegmatitas del Macizo de Labourd (Pirineos Vascos). Comunicación oral (1987).
 46. GODINHO, M. M.: O plutonito do Caramulo. *Mem. e Not.*, 89-90 (1980), 269.
 47. PRINCE, E., DONNAY, G. y MARTIN, R. F.: Neutron diffraction refinement an ordered orthoclase structure. *Amer. Mineral.*, 58 (1973), 500-507.
 48. HART, S. R.: The petrology and isotopic-mineral age relations of a contact zone in the Front Range, Colorado. *J. Geol.*, 72 (1964), 493-525.
 49. CERNY, P. y CHAPMAN, R.: Paragenesis, chemistry and Structural state of adularia from granitic pegmatites. *Bull. Mineral.*, 107 (1984), 369-384.
 50. DELBOVE, F.: Excess Gibbs Energy of Microcline-Low Albite Alkali Feldspar at 800°C and 1 Bar, Based on fused Alkali Bromide Ion-Exchange Experiments. *American Miner.*, 60 (1975), 972-984.
 51. BABU, V. R. R. M.: Study of minerals from the pegmatites of the Nellore mica-belt, Andhra Pradesh, India. Part I. Microcline perthites. *Mineralogical Magazine*, 37 (1969), 135-139.
 52. GODINHO, M. M.: Estudos de mineralogia e geoquímica sobre os granitoides da região de Guardao (Caramulo-Portugal). *Memorias e Noticias*, 93 (1982), 35-55.
 53. CERNY, P. y MACEK, J.: The Tanco pegmatite at Bernic Lake, Manitoba V Coloured potassium feldspar. *Canadian Miner.*, 11 (1972), 679-689.
 54. FERGUSON, R. B., TRAILL, R. J. y TAYLOR, W. H.: The Crystal Structures of Low-Temperature and high-Temperature Albites. *Acta Cryst.*, 11 (1958), 331-338.
 55. STEWART, D. B. y LIMBACH, D.: Thermal expansion of low and high albite. *American Miner.*, 52 (1967), 389-413.
 56. SMITH, J. V.: The powder patterns and lattice parameters of plagioclase feldspar I. The soda-rich plagioclases. *Mineral Mag.*, 31 (1956), 47-68.
 57. COLE, D. F., SORUN, W. H. y TAYLOR: The structure of plagioclase feldspar I. *Acta Crystallogr.*, 4 (1951), 20-29.
 58. ZEIPERT, V. C. y WONDRAUSCHECK, H.: Fin ungewöhnliches Tempverhalten bei Sanidin von Volkersfeld-Eifel. *N. Jb. Miner. Mh.*, 9 (1981), 407-415.
 59. WEITZ, B.: Die struktur des sanidins bei verschiedenen Ordnungsgraden. *Z. Krystall.*, 136 (1972), 418-426.
 60. KROLL, H.: Determination of Al, Si distribution in alkali feldspar from X-ray powder data. *Neues Jahrb Mineral Monastsh.*, 2 (1971), 91-94.
 61. MARTIN, R. F.: Hydrothermal synthesis of low albite, orthoclase, and non-stoichiometric albite (1968). Ph. D. Thesis, Stanford Univ.
 62. LUTH, W. C. y QUEROL-SUÑE, F.: An Alkali Feldspars Series. *Contrib. Mineral. Petrol.*, 25 (1970), 25-40.
 63. ORVILLE, P. M.: Unit-cell parameters of the microcline-low albite and the sanidine high albite solid solution series. *American Miner.*, 52 (1967), 55-81.
 64. HENDERSON, C. M. B.: An elevated temperature X-ray study of synthetic disordered Na-K alkali feldspars. *Contrib. Mineral. Petrol.*, 70 (1979), 71-79.
 65. HASELTON, H. T., HOVIS, G. L., HEMINGWAY, B. y ROBIE, R.: Calorimetric investigation of the excess entropy of mixing in analbite-sanidine solid solutions: lack of evidence for Na, K short range order and implications. *American Miner.*, 68 (1983), 398-413.
 66. DONNAY, G. y DONNAY, J. D. H.: The symmetry change in the high temperature alkali feldspar series. *American Jour. of Sci.*, 250 (1952), 115-132.
 67. COLE, W. F., SÖRUM, H. y KENNARD, O.: The crystal structures of orthoclase and sanitized orthoclase. *Acta Crystallogr.*, 2 (1949), 280-287.
 68. SHAW, H. R.: The four-phase curve sanidine-quartz-liquid-gas between 500 and 4.000 bars. *Amer. Mineral.*, 48 (1963), 883-896.
 69. WRIGHT, T. L.: X-ray and optical study of alkali feldspar: II an X-ray method for determining the composition and structural state from measurement of 2i values for three reflections. *Am. Miner.*, 53 (1968), 88-104.
 70. WALDBAUM, D. y ROBIE, R. A.: Calorimetric investigation of Na-K mixing and polymorphism in the alkali feldspars. *Z. Kristall.*, 134 (1971), 381-420.
 71. MÜLLER, G.: Die Abhängigkeit der Gitterkonstanten und der Misch Kristallbildung der Na und K-Feldspate vom Ordnungszustand. Ph. D. Dissertation Technische Univ. Karlsruhe (1969).
 72. GRUNDY, H. D. y BROWN, W. L.: A high temperature X-ray study of the equilibrium forms of albite. *Mineralogical Mag.*, 286 (1969), 156-172.
 73. RAASE, P.: Zur synthese und stabilität der albit modifikationen. *Tschermaks Mineral Petr. Mitt.*, 16 (1971), 136-155.
 74. EGGLETON, R. A.: The ordering path for igneous K-feldspar megacryst. *American Miner.*, 64 (1979), 906-911.
 75. EMELEUS, C. H. y SMITH, J. V.: The alkali feldspar VI. Sanidine and orthoclase perthites from the Slieve Gullion Area. Northern Ireland. *American Miner.*, 44 (1959), 1.187-1.209.
 76. FOX, P. E. y MOORE, J. M., Jr.: Feldspars from Adamant pluton British Columbia. *Canadian J. Earth Sci.*, 6 (1969), 1.199-1.209.
 77. WRIGHT, T. L.: The alkali feldspars of the Tatoosh

pluton in Mount Rainier National Park. *Amer. Mineral.*, 49 (1964), 715-735.

78. DAL NEGRO, A., DEPIERI, R., QUARENI, S. y TAYLOR, W. H.: The crystal structures of mine K feldspars

from the Adamello Massif (Northern Italy). *Acta Crystallogr.*, B346 (1978), 2,699-2.707.

79. HEULETT, C. G.: Optical properties of potassic feldspars. *Geol. Soc. Amer. Bull.*, 70 (1959), 511-538.

